



NVIDIA Tesla® K20/K20X GPU アクセラレータ

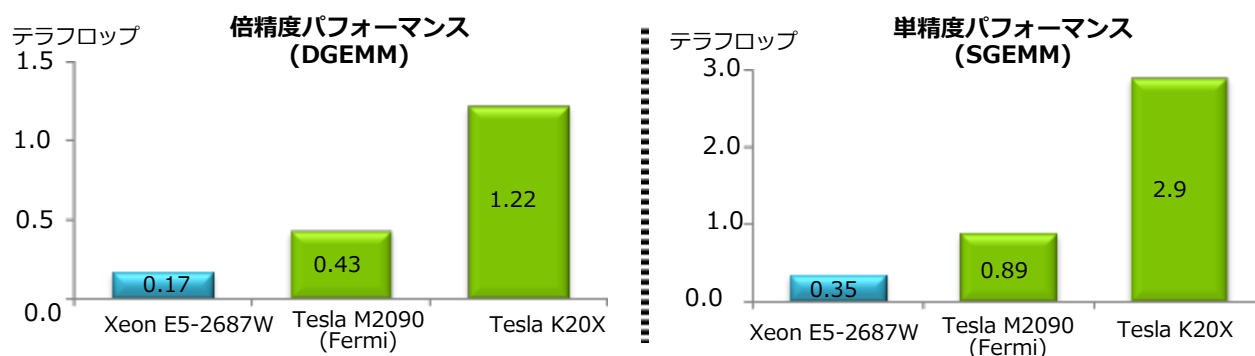
アプリケーション・パフォーマンス・テクニカル・ブリーフ

NVIDIA®は Fermi アーキテクチャ GPU の発表により、パフォーマンス、エネルギー効率の両面で飛躍的な性能向上を実現し、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) の世界に変革をもたらしました。また、実際に GPU の性能を効率的に引き出すための並列プログラミング・モデル、CUDA を提供し、C、C++、Fortran といった業界標準のプログラミング言語を基に拡張命令を追加し、容易な並列プログラミング環境を実現してきました。

そして今、HPC 業界をさらに進化させるアクセラレータとして、Tesla® K20/K20X GPU が新たに登場しました。革新的な Kepler™アーキテクチャを採用し、コンピューティングのエネルギー効率の基準値を書き換えるとともに、SMX、Hyper-Q、ダイナミック並列処理などの画期的なテクノロジーを搭載し、アプリケーションのパフォーマンスを 10 倍のスケールまで高めることができます。

SMX : 消費電力あたりのパフォーマンスが 3 倍

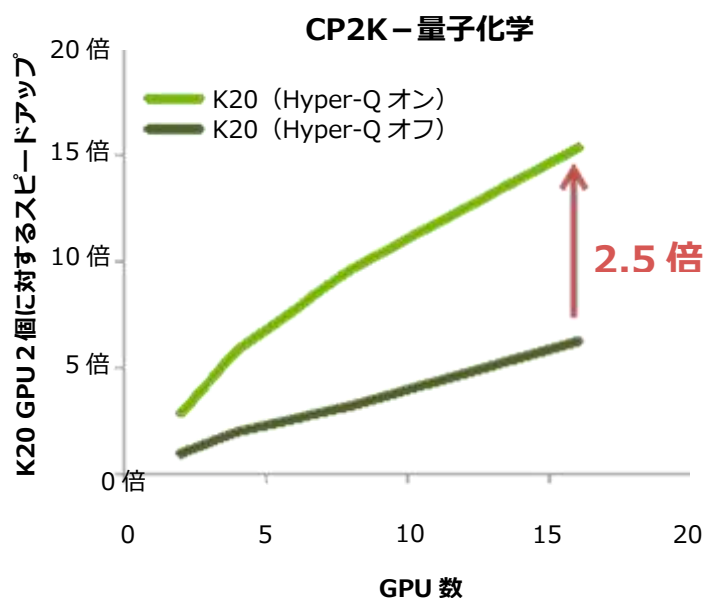
新登場の SMX は革新的なアーキテクチャに基づき、高効率で高いパフォーマンスが発揮できるように根本から再設計されました。SMX を採用した Tesla K20/K20X アクセラレータは、業界最高クラスの演算性能を備え、Tesla K20X の場合には、浮動小数点演算性能の理論値が単精度で 3.95 テラフロップス、倍精度で 1.31 テラフロップスに及びます。計算効率の面でも、行列乗算の例では 93%と過去に類を見ないレベルを達成しています。



Hyper-Q : 従来の MPI コードを簡単にスピードアップ

従来の MPI コードは基本的に CPU コア用として書かれていて、殆どの場合 GPU をフルに利用できるだけの作業量が生成されません。各 MPI プロセスに、より多くの作業負荷を割り振るようにコードを書き換えれば GPU をフル活用することも可能ですが、それは開発者にとって大きな負担になります。Hyper-Q の機能により、小規模から中規模の作業負荷を持つ MPI プロセスを最大で 32 個、ひとつの GPU 上で同時処理させることが可能で、効率化のための開発者の負担が大幅に削減されます。

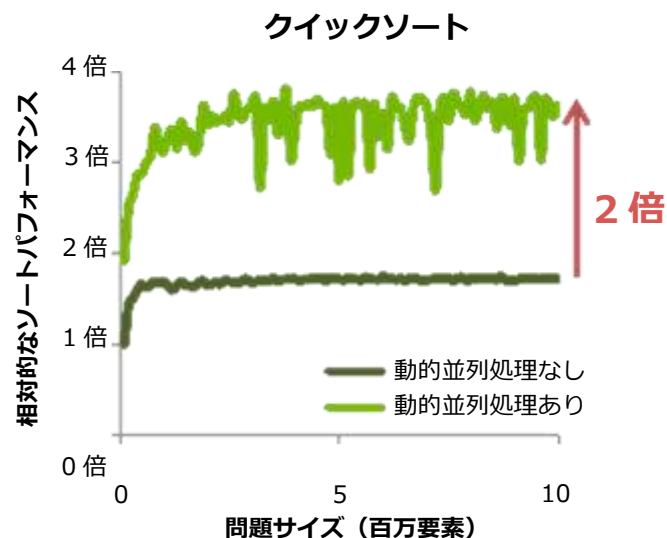
ここでは、GPU では取り扱いにくいとされていた CP2K というコードを実例として、Hyper-Q の力をご紹介します。CP2K は、広く利用されている MPI ベースの量子化学コードです。Hyper-Q を使用すると、ひとつの共有 GPU で 16 本の MPI ランクを実行した場合、そのパフォーマンスは Hyper-Q なしの場合に比べて倍以上になりました。



ダイナミック並列処理：並列プログラミングをシンプルに

ダイナミック並列処理では、GPUがCUDAカーネルの実行時に、その実行中のカーネル内部からGPU自身の新たなタスクを生成するという方法で、CPUに頼らず、自律的にGPUを動作させることができます。シンプルなコンセプトですが、とてもパワフルな手法で、従来難しいと言われていた分割統治法などのようなアルゴリズムでGPUプログラミングを容易にし、大きな効果を発揮します。

よく知られたソートのアルゴリズムである「クイックソート」にダイナミック並列処理を適用し、その能力を見てみましょう。結果として、コードの行数を半減させた上に、パフォーマンスを倍増することができます。

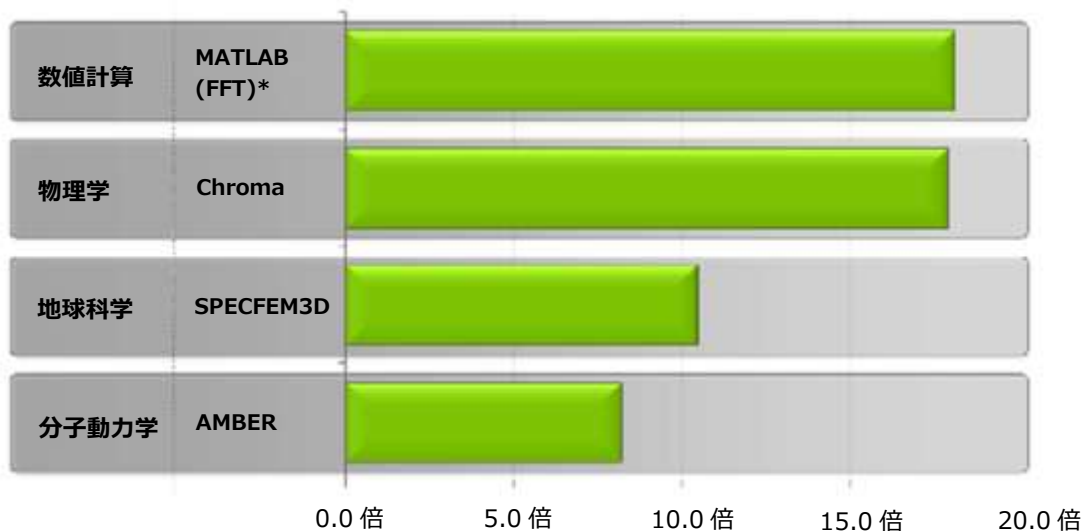


科学技術計算を最大で 10 倍に高速化

現在、GPU アクセラレーションの高性能を享受しているアプリケーションは数百種類もあり、科学や工学の広い分野がカバーされていますが、その数はさらに増え続けています。過去 1 年間だけでも、CUDA で高速化されたアプリケーションの数は 60% も増加しました。

Sandy Bridge CPU 搭載のサーバに Tesla K20 GPU アクセラレータを追加すると、CUDA 対応アプリケーションのスピードは一般的に 10 倍程度加速されます。さまざまな科学分野の代表的なアプリケーションについて、単一ノード上のパフォーマンスをベンチマークした結果を以下に示します。

Sandy Bridge CPU に対する Tesla K20X のパフォーマンス

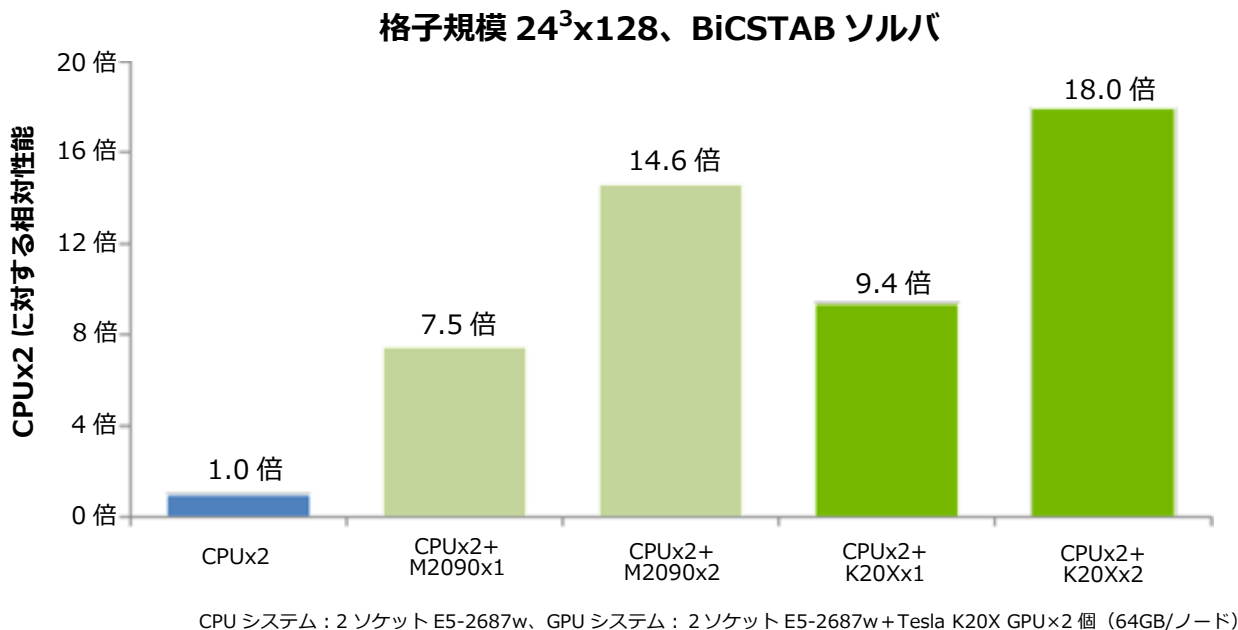


CPU システム：デュアルソケット E5-2687w、GPU システム：デュアルソケット E5-2687w + Tesla K20X GPU × 2 個
* MATLAB の結果発表、i7-2600K CPU 1 個と Tesla K20 GPU 1 個を比較

前述のアプリケーションのうち、3種類についてもう少し詳しく見てみましょう。

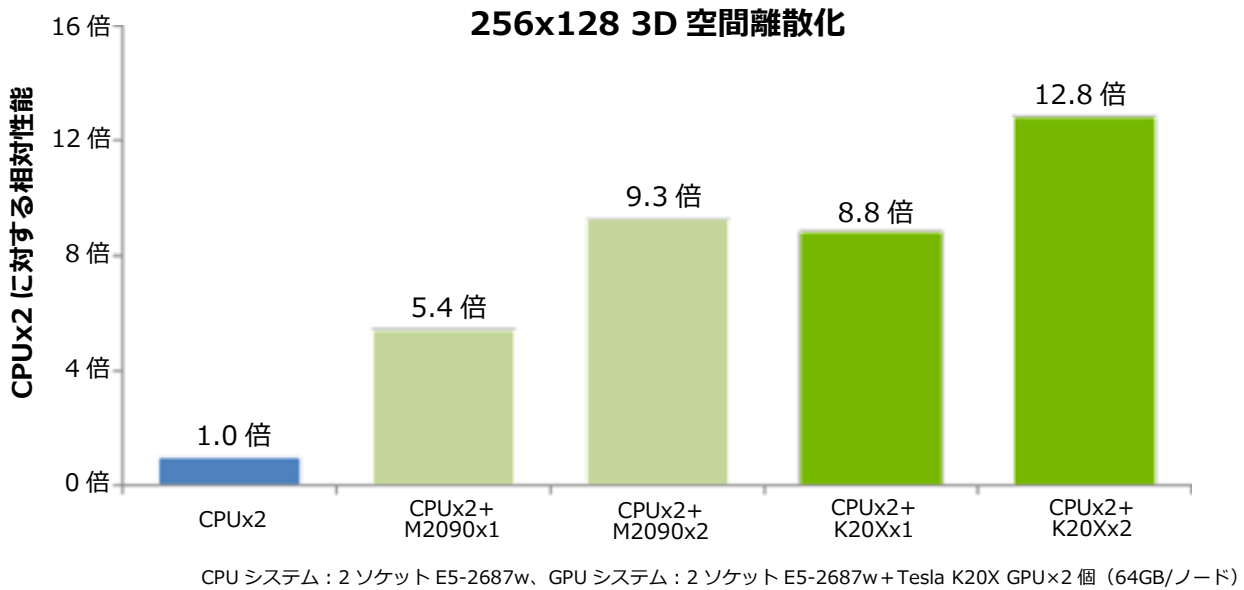
Chroma : 高エネルギー、核物理学

Chroma は、物質とエネルギーの基本的な性質について理解をより深めるため、物理学の標準理論と異なる理論を検証する際によく用いられます。次のグラフは、2ソケット CPU に Tesla K20X GPU アクセラレータを 1 個あるいは 2 個追加した場合に、パフォーマンスがどの程度上昇するのかをまとめたものです。



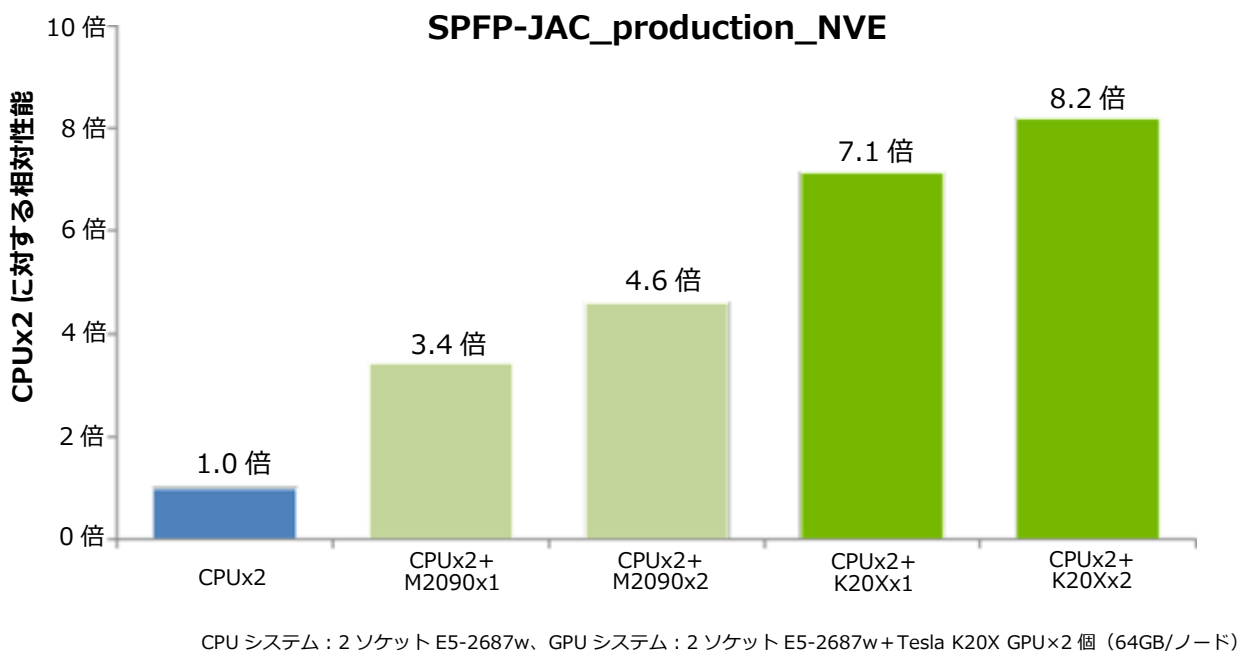
SPECFEM3D : 地球科学

SPECFEM3D は、地震活動の原因となる現象について深く理解し、潜在的な様々な危険性について調査や評価を行い、その構造的な対策を構築するために用いられます。このコードは GPU に対応する前の 2008 年に、ゴードン・ベル賞を授与されています。つまり、もともと高度にチューニングされていたコードを GPU でさらに高速化したわけです。



AMBER : 分子動力学

分子動力学 (MD) は、フェムト秒からミリ秒という時間スケールで、生物学的あるいは化学的な系の原子レベルでの振る舞いを研究することを可能にします。MD シミュレーションに対応したソフトウェアパッケージは数多くありますが、そのなかでも特によく利用されているのが AMBER です。AMBER を、Tesla K20X GPU アクセラレータで動作させると、Tesla M2090 GPU に対して最大で 80% 程度も処理が高速になります。



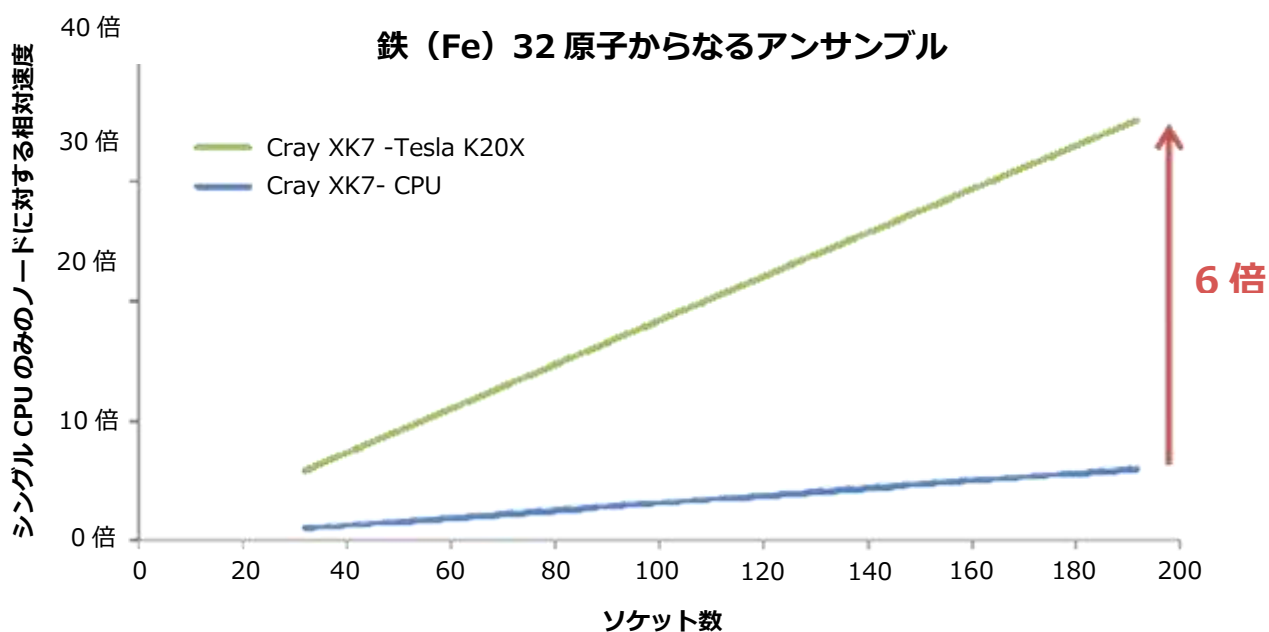
大規模クラスタでの GPU の利用とアプリケーションの高速化

世界各地にある大規模クラスタ・システムでも、GPU を導入しトータルの処理能力を向上させようという動きが広がっています。Top500 リストにランキングされたシステムのうち、GPU による高速化に対応したシステムは、2011 年 6 月から 2012 年 6 月で 400% も増加しました。

GPU による高速化に対応しているか否かにかかわらず、ノード数の増加に対してスケーリングするコードを設計することは難しい作業になります。GPU による高速化に対応したアプリケーションは、ひとつのノードに多くの並列作業を割り当てて並列度を高め、MPI を使って GPU の作業負荷を配分することができるため、多くの場合にスケーリングしやすくなります。

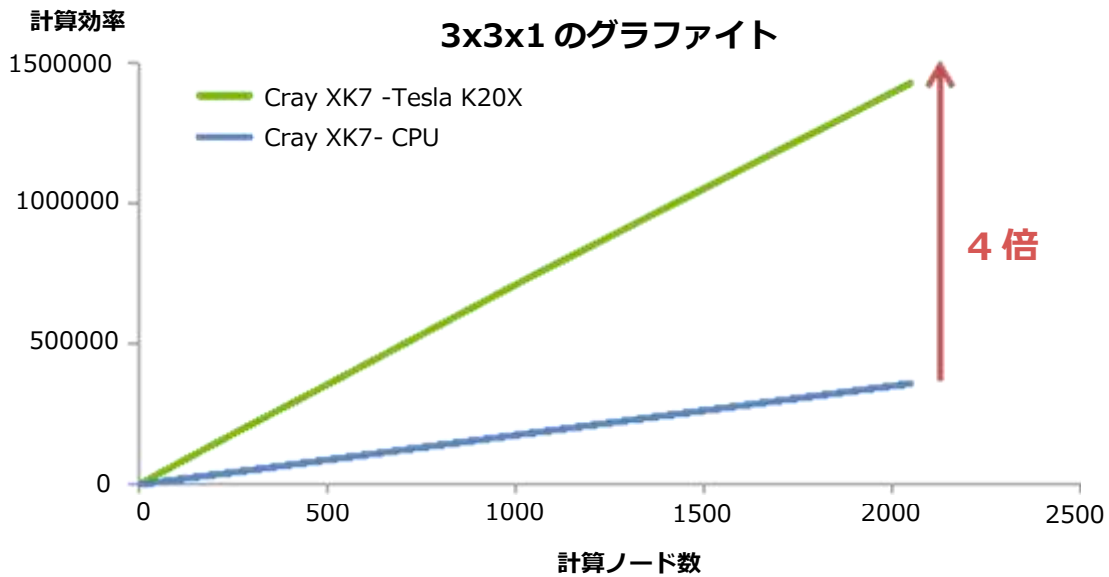
WL-LSMS : 材料科学

WL-LSMS は、原子レベルやナノスケールで物質の磁気的な振る舞いをシミュレーションするアプリケーションで、高効率な電動モーター、発電機、磁気記憶装置に必要となる軽量で強力な磁気部品の設計に使用されます。2009 年にゴードン・ベル賞を授与されたことからわかるように、WL-LSMS は、もともと高度にチューニングされていたコードであり、GPU によりさらに高速化されたわけです。



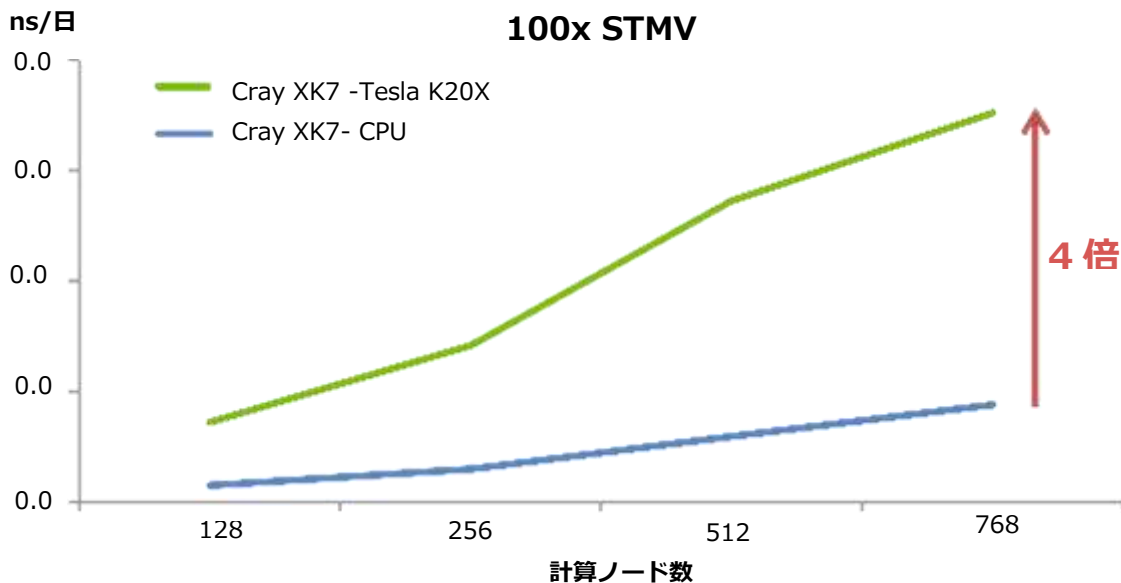
QMCPACK : 材料科学

QMCPACK は、物性物理学、材料科学、化学の分野で、従来よりも物理的精度の高い手法で新たな知見を得ようとする研究者によく使われるアプリケーションです。取り扱う電子の数が 200 あるいはそれ以上に及ぶ大きな系についてシミュレーションを行う場合、ひとつのシミュレーションを行うために要する時間は、従来は 12 時間以上必要でしたが、GPU の利用により 3 時間程度に短縮できるようになりました。



NAMD : 分子動力学

NAMD は Charm++ 並列プログラミング・モデルで書かれた分子動力学のシミュレーションパッケージで、無償で利用することができます。名前の由来は、“Not (just) Another Molecular Dynamics (単なる分子動力学プログラムではない)”です。NAMD は並列処理の効率が高く、大規模な系（数百万原子）のシミュレーションによく用いられます。NAMD もまた、GPU を搭載したノードの数に対して、トータルのパフォーマンスがスケーリングしやすいという特長があります。



Tesla K20/K20X GPU アクセラレータに関するより詳しい情報は、www.nvidia.co.jp/tesla をご覧ください。